

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
中間とりまとめ骨子案について

1. 計算科学技術の動向

- ・ 従前、我が国では数値風洞、CP-PACS、地球シミュレータといったスパコンを開発してきた。そうした中、個別分野にとどまらない汎用の京速計算機を目指すプロジェクトとして平成 18 年度から京の開発が開始され、平成 23 年 6 月、11 月に TOP500 でランキング 1 位を獲得、平成 24 年 9 月に共用が開始された。同時に、多様なユーザーニーズに応える環境を整備するため、京を中核とする HPCI を構築。産業界を含む(高田委員)幅広い分野の研究者に利用されてきた。また分野横断的な形で先端技術を担う研究者・技術者の育成も進んでいる(高田委員)。
- ・ 第 5 期科学技術基本計画で目標として掲げられている『Society5.0』の実現のためには、シミュレーションによる社会的課題の解決、人工知能(AI)などの新しい情報技術の開発や情報の流通・処理に関する技術開発を加速する必要がある、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠。引き続き上記の取組を推進する必要。
- ・ また、計算科学技術の発達は、科学方法論として、理論科学、実験・観測科学に続くシミュレーションを中核とする計算科学(第 3 の科学)の実現を可能としたが、近年の計算機能力の向上により、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いる。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しいパラダイムを創る重要な国家的課題。ポスト「京」の次の戦略を視野に入れた取組が重要(高田委員)。
- ・ 平成 26 年度から開発されているポスト「京」について、アプリケーション開発、システムともに平成 30 年度に文部科学省、総合科学技術・イノベーション会議で中間評価を実施。特に後者において、「製造・設置を遅延なく推進していくことが適当」と評価されている。
- ・ ポスト「京」は、アプリケーションとの Co-design による高いアプリケーション能力、重点課題・萌芽的課題における多くの科学的成果創出の準備、高性能の達成と、容易なプログラミング・高実用性の両立を目指して開発されている。当初は、シミュレーションを中心とした応用を対象とした Co-Design が行われたが、チップ自身の高演算性能(高速メモリ、高メモリバンド幅)、高い省電力性能、Arm プロセッサの命令セット採用による Arm プロセッサファミリーによる「エコシステム」の充実等により、ビッグデータ、AI 分野への応用の展開も期待される。
- ・ 国際動向【P】
- ・ 地元自治体、産業界からの期待【P】

2. ポスト「京」の成果創出加速に向けて

- ・ ポスト「京」を用いた成果として想定されるのは、新たな科学的知見の発見といった科学的成果と産業応用や災害予測といった社会的成果であり、具体的にはアプリケーションによって創出されるもの。
- ・ このため、ポスト「京」の成果の早期創出及び最大化に向けた取組として、平成 26 年度から、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）として 9 課題、平成 28 年度から萌芽的課題として 4 課題について、ポスト京の運用開始直後に最大の成果を創出できるよう、アプリケーションの開発や社会実装に向けた準備が着実に進められている。
- ・ それらのアプリケーションにおいて、ポスト京を活用すると、具体的に以下のような成果が創出されることが想定されている。

【健康長寿社会の実現】

- 生体内での薬剤の作用を高速かつ正確にシミュレーションすることで、がんや難病などのゲノム情報から新薬候補を探索するゲノム創薬の加速や、患者に最適な（薬効最大、副作用最小の）薬剤選択を可能にするゲノム医療さらには再生医療へ貢献する。
- 超高齢社会の三大疾患「がん・脳機能障害・心疾患」。多様な病態をもつこれらの疾患に対し、健康・医療ビッグデータ解析とシミュレーションにより、一人一人に適した治療や予防を支援し、健康長寿社会に資する。

【防災・環境問題】

- 既に、内閣府が広域地震シミュレーションを利用し、防災コンサルは都市地震・津波シミュレーションの利用に取り組んでいる。シミュレーションに使う都市モデルの自動構築手法も建設産業での利用が検討されている。
- 観測ビッグデータを活用した巨大アンサンブル数での超高解像度予測シミュレーションを実現することにより、豪雨などの極端現象の予測精度を格段に向上し、現象が起こるまでに 12 時間の猶予を確保できるようにする。

【エネルギー問題】

- 高効率で再生可能なエネルギー技術（人工光合成、二次電池、燃料電池など）のキーポイントとなる原子・分子のミクロな振る舞いを、大規模現実系のシミュレーションにより実験・産業と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を確立する。
- 石炭ガス化炉、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉の革新的クリーンエネルギーシステムのデジタルツインとして、丸ごとマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを構築し、大幅な信頼性向上、コスト削減等に貢献する。

【産業競争力の強化】

- パワー半導体の抜本的性能向上や高性能モータ／発電機用永久磁石の新材料提案など、超スマート社会の実現に不可欠な次世代デバイス・材料の開発を、最先端学理に基づく大規模シミュレーションと AI で加速し、産業競争力強化に貢献する。
- 本格実施フェーズにおいて高速化・高精度化された、自動車、ターボ機械、航空機等を対象としたアプリの、ポスト「京」を利用した効果の実証と実用化を行い、それぞれの分野の、産業界の研究者が参加するコンソーシアムによる展開を行う。

【基礎科学の発展】

- ビッグバン直後の密度ゆらぎの銀河への成長や、太陽の 100 兆倍もの密度を持つ中性子星の衝突による重元素放出の様子、原子核構造や素粒子間に働く力等を精密計算し、実験・観測と組み合わせて宇宙と物質の成り立ちを解明する。
- ・ また、開発されたアプリケーションを普及させる取組として、例えばものづくり分野では、アプリケーション開発者と利用者の共創の場としてポータルサイト（MateriApps）が整備され、約 250 アプリが登録されるとともに、約 13,000PV／月（うち海外が 25%）、約 3600 ユーザー／月に利用されているなど、開発者・利用者によるエコシステムが構築されている。
- ・ 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」（以下、「重点課題報告書」という。）において、2020 年度以降は成果創出フェーズとされており、今まで開発されてきたアプリケーションを活用し、ポスト京だからこそ達成可能となる科学的課題の解決、あるいは我が国の実社会経済への実装による社会的課題の解決といった早期の成果創出を目指す必要。
- ・ また、1. にも記載したデータ科学や AI に代表されるように、平成 26 年度以降にポスト「京」を活用して大きな成果を創出することが見込まれる課題が新たに想定されるため、成果創出フェーズではそのような課題への対応も必要となる。
- ・ そのため、成果創出フェーズでは具体的に以下のような取組を進めるべき。

① 重点課題、萌芽的課題で開発されてきたアプリケーション

- ・ ポスト「京」による早期成果創出のためには重点課題および萌芽的課題等(藤井委員)で開発してきたアプリケーションを利用することが最も効率的であり、当初の計画通り 2020 年から成果創出フェーズを開始すべき。
- ・ 成果創出フェーズの実施にあたっては、これまでのアプリケーションの開発成果と今後の成果創出に向けた準備状況、産業上の実課題への取組、今後のアプリケーション普及戦略等について現体制の評価を行った上で、早期成果創出に向けて最適な体制を検討すべき。
- ・ また、早期成果創出の観点から、早ければ 2020 年から開始されるポスト京アーリーアクセスプログラムの活用、HPCI 第 2 階層資源の効率的な活用も必要である。

② 新たな課題への対応

- ・ 平成 26 年 8 月に重点課題報告書が取りまとめられて以降、計算科学分野の進展や社会経済状況の変化により、ポスト京を用いることで科学的、社会的課題の解決が期待できる取組について、評価を経た上で、本格実施に移行するような新たな取り組みも必要。
- ・ 想定される分野として、近年発展の著しい AI を含むデータ科学があげられる。これらの分野による利用はもちろん、既存の計算科学（シミュレーション）と 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（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）をポスト「京」の計算資源を活用して推進。
- ・ すでに、計算科学とデータ科学の融合は、9つの重点課題や萌芽的課題（藤井委員）の中でも行われており、そのさらなる発展に期待。さらに、これまでに想定していなかったビッグデータや AI 技術を用いた新しいアプリケーションへの展開も新しい体制整備も含めて（高田委員）検討すべき。
- ・ また、計算で得られた計算結果データも貴重な知的資源であり、研究機関等で収集される実験データも含めて（高田委員）その利活用に対する方策も同時に検討すべき。

③ 事業共通の進め方

- ・ 成果を社会に実装する観点から、国が実施する他の研究プロジェクト、産業界とのコンソーシアム、行政組織等との連携体制を重視し、実装が順調に進捗しているか確認することが必要。
- ・ 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プロジェクトの重要な成果の一つであり、広く普及するための長期展望に立って計画を立て、組織的に取組を推進することが必要。欧州の CoE の取組なども参考に、分野特性を踏まえつつ、アプリケーションごとに最適なエコシステム構築戦略を検討すべき。
- ・ ポスト京開発には多大な国費が投入されており、国民への重大な説明責任が存在。また、産業利用の拡大のためには経営層の理解も不可欠。このため、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・技術的成果だけでなく、実際の製品開発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広報活動を実施すべき。
- ・ 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）を横展開することでより効果的、効率的な成果創出が期待できるため、それを可能とするプロジェクトの体制（プログラムディレクターの導入、プロジェクト管理組織の活用等）を検討すべき。

3. ポスト「京」の利活用促進について

- ・ 京はスパコンとして初めて特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（以下、共用法という）の特定先端大型研究施設に位置付けられ、世界最高レベルの科学技術インフラとして多くのユーザーに利用されるため、共用の促進に関する基本的な方針のもと、国の責務として施設・設備等の利用環境整備や公正な課題選定等を実施することとされた。
- ・ また、「京」を中核とした HPCI も併せて構築され、幅広いユーザーに使い勝手のよい環境を構築することができた。
- ・ 公募制度も、若手人材育成課題、産業利用課題、トライアルユースといった制度の創設、公募時期の年2回への拡大など、HPCI コンソーシアム、利用者、産業界からの声を踏まえて柔軟に対応してきたところ。
- ・ ポスト京では、京で培ってきたこれらの制度の良いところは踏襲しつつ、更なる利便性の向上、利用分野の拡大、成果創出の最大化を目指し、利活用に関する方針を検討する必要がある。
- ・ 平成26年6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」の中では、計算資源配分の骨子として、重点課題枠（30-40%）、一般利用枠・分野振興枠（30-40%）、産業利用枠（10%）、政策対応枠（10%）、調整高度化枠（10%）とされていた。
- ・ 基本的には、この枠組を踏襲しつつ、以下のような状況変化に対応する方策を具体化する必要がある。

重点課題：分野特性に応じた利用方法（緊急的な利用等）、利用体制の検討（コンソーシアム方式等）

一般利用枠：AI やデータ科学等の新たな分野からの提案への対応、応募・採択の容易な利用方法（お試し枠）を求める声への対応

産業利用枠：柔軟で使いやすい産業利用枠の設置、コンソーシアム方式にいるアプリ実証研究などの幅広い(高田委員)産業利用につながる施策の推進、クラウド型など新たな利用形態への対応

政策対応枠：他の国家プロジェクトの利用拡大（計算資源のみの提供）

- ・ 今後は官民のもつビックデータを活用したデータ科学に関する需要が高まることが予想されるため、AI、データ科学分野の潜在的ユーザーにポスト「京」を活用してもらうための方策が必要（例えば、大半のデータサイエンティストが使用している Python 環境を HPC 上でも実現するインターフェースの整備等）。
- ・ 今後も計算科学の進展や社会情勢の変化によってポスト京に対するユーザーのニーズは変化し続けることが予想されるため、定期的にユーザーも求める機能やサポート等を把握するとともに、適切に対応をとるための取組を継続的に実施する必要。
- ・ 成果早期創出の観点から、今まで RIST が京のためにプリインストールしてきたアプ

リケーションを、引き続きポスト京で利用できるように維持・管理すべき。

- ・ 早ければ 2020 年度から開始されるポスト京のアーリーアクセスプログラムについて、早期成果創出の観点から、一般の研究者や産業界の利用を可能とすることが重要。
- ・ ポスト京から創出される膨大な計算結果は、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り、産業界も含めた幅広いユーザーに活用してもらえよう、メタデータの整備も含め、データの蓄積と提供を組織的に行う方法について検討すべき。
- ・ 新しい利用形態（有償利用のあり方等）【P】

4. 将来の我が国が整備すべき計算基盤と計算科学技術の振興

■ 将来的な HPCI のあり方

- ・ 平成 24 年 6 月の共用開始以降、HPCI の中核だった「京」の運用が停止され、ポスト「京」の運用が開始されることで、HPCI の体制に大きな変更が生じる。また、先に述べた AI やデータ科学の勃興、社会的な IoT 技術の進展など、HPCI を巡る情勢も大きな変化が生じており、まさに今後 HPCI にとって変革期に入ることになると思われる。
- ・ 当委員会はポスト「京」の利活用・成果創出を検討することが目的だったため主要な議題とはしなかったものの、ポスト「京」も HPCI の一員であることから、別の場において、今後の我が国の科学技術のインフラとしての情報基盤（スーパーコンピュータ、高速ネットワーク、大容量記憶など）のあり方について議論され、大きな科学技術振興のグランドデザインに基づき、HPCI の将来的なあり方についても検討されることが期待される。
- ・ 我が国の科学技術を支える基盤としての安定的な運用と更新による切れ目のないサービスの継続の必要性。

■ アプリケーションの普及【P】