

**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 報告書(案)**

1. 背景

1-1 計算科学技術の動向

自然現象であれ、社会現象であれ、我々を取り巻くさまざまな現象は、多数の要素が相互に影響しあいながら起こっている。計算科学とは、これらの現象を記述する多数の変数を超高速・大規模な数値計算により、つて分析することにより、現象の支配方程式の近似解を求めるなど、現象の背後に潜む法則性を定量的に理解し、現象の本質を理解したり、さらに進んで予測を行ったりする科学である。このような計算科学は、20世紀半ばに発明された電子計算機、さらには、1970年代に登場し、現在も進化し続けるスーパーコンピュータによって大きく発展してきた実現した¹。

コメントの追加 [A1]: 加藤委員、藤井委員

コメントの追加 [A2]: 加藤委員

第5期科学技術基本計画では、サイバー空間（仮想空間）とフィジカル空間（現実空間）を高度に融合させたシステムにより、経済発展と社会的課題の解決を両立する人間中心の社会である「Society 5.0」の実現が目標として掲げられている。

予測の科学である計算科学は、これまで、対象の合理的な理解に基づくモデリングによる演繹的な方法、すなわちシミュレーションとして発達してきたが、対象の観察に基づくモデリングによる帰納的な方法であるデータ科学が、スーパーコンピュータを利用した膨大なデータ処理に基づく Artificial Intelligence (AI)、特に、深層学習の発達によって、計算科学に新たな可能性をもたらしている。シミュレーションだけにより全ての現象の本質を理解することにはには、すべての現象を合理的に理解することはできないという限界があり、データ科学にも、は、得られたる観測データからの推論には精度的なという限界がある。日本経済団体連合会の「AI活用戦略」においても、「シミュレーションなどで評価可能なデータを大量に生成することは合理的であるばかりでなく、遭遇していない事象への反応の評価を可能にするという点で重要なアプローチである」、「高度なAIシステムの開発には、AI技術のみならず、応用領域に関する深い知識、シミュレーション技術、大規模数値計算など総合的な技術力が必要となる」ことが指摘されている²。第5期科学技術基本計画の掲げる「Society 5.0」の実現のためには、大規模スーパーコンピュータの計算資源を最大限に活用し

コメントの追加 [A3]: 白井委員

コメントの追加 [A4]: 加藤委員、住委員

¹ 岩波講座 計算科学1 『計算の科学』、2013年、岩波書店、1ページ

² 『AI活用戦略～AI-Readyな社会の実現に向けて～』、2019年、一般社団法人日本経済団体連合会、7ページ

つつ、第1の科学的手法である「実験」、第2の科学的手法である「理論科学」に続く、第3の科学的手法である「シミュレーション」と、第4の科学ともいわれる「データ科学」の両手法を、適所で活用しながら、人間の知恵や知識とも融合させ、新たなパラダイムを作り出していくような研究開発が求められている。

また、今後の計算科学の推進のためには、それを支える人材育成が必要不可欠である。我が国では、Society5.0の実現のために、小学校でのプログラミングの必修化や「情報I」の必修化をはじめとする新学習指導要領におけるプログラミング教育の充実、大学生への数理データサイエンス教育の充実、実務家教員の育成・活用、さらには産学連携による実践的活用スキルを習得できる機会の提供の充実といった取組が推進されはじめている。

コメントの追加 [A5]: 高田委員

1-2 我が国のスーパーコンピュータ開発をめぐる動向

平成の時代になり以降、我が国の産学の主導によって、数値風洞(平成5年)、CP-PACS(平成8年)、地球シミュレータ(平成14年)といった世界最速のスーパーコンピュータが開発され、科学技術と産業の進展に大きく貢献してきた。そうした中、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」の開発が開始された。「京」は、約8万3000個のCPUを同時に使うことで、1秒間に1京回(1兆の1万倍)の計算処理を実現し、平成23年11月にLINPACK性能で10ペタFLOPSを達成、平成24年9月から共用が開始された。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(HPCI)が構築され、産業界を含む幅広い分野の研究者に利用されるとともに、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。地元自治体においても、京を活用した「計算科学」の振興を中心に、新産業・新技術開拓やイノベーション創出に向けた支援が実施され、神戸医療産業都市において計算科学分野の拠点が形成されてきた。

コメントの追加 [A6]: 加藤委員

平成26年度から開発されているポスト「京」については、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心につながる最先端の研究基盤として、2021~22年の運用開始を目標に、世界最高水準の、汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指して、研究開発プロジェクトが推進

コメントの追加 [A7]: 加藤委員

されてきた。アプリケーションの対象としては、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題が選定され、さらに、システムとアプリケーションを協調的に開発（Co-design）することにより、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を実現することが具体的な目標に設定され、プロジェクトは推進されている。ポスト「京」の開発当初より、シミュレーションを中心とした応用を対象にとしたCo-designが行われてきたが、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分野での利活用も期待される。平成30年度に文部科学省及び総合科学技術・イノベーション会議はポスト「京」の中間評価を実施し、「製造・設置に向け遅延なく推進していくことが適当」と評価された。

コメントの追加 [A8]: 加藤委員

近年、第1の科学的手法である経験科学（実験）、第2の科学的手法である理論科学、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、データ科学が注目されるようになった。特に、2000年以降の深層学習（ディープラーニング）の急速な発達が、第4の科学であるデータ科学を支えている。深層学習の原理そのものは1970年代から存在したが、深層学習に支えられたデータ科学の爆発的な隆盛の背景には、デジタル化の進展により機械で読み取ることのできる可読な大量のデータが産出されるようになったことなどに加え、スーパーコンピュータの性能向上が大きな要因としてある。深層学習は、学習データ量を増やすことによって精度が向上するが、そのためには大量の計算が必要となる。このため、深層学習に関してもシミュレーションと同様に、ハード、ソフト両面での高速化の工夫であり、また、CPUを大規模並列化することによってスーパーコンピュータの計算能力がある水準を超えることが不可欠であり、2000年以降それが起こったのである。

コメントの追加 [A9]: 加藤委員

コメントの追加 [A10]: 住委員

Hyperion Research社の調査によれば、深層学習・機械学習・人工知能（AI）向けスーパーコンピュータ（HPC）の市場規模は、2015年から2020年で約5倍となると予測されている。2019年2月に発出されたAIイニシアティブに関する米国の大統領令においても、AI関連アプリケーションに高性能コンピュータ資源（High-performance computing resources）を優先配分することが要請されている。欧州で

コメントの追加 [A11]: 加藤委員

は、研究・イノベーションプログラムである「Horizon2020」に基づき、「インフラ」(PRACE)、「テクノロジー」(ETP4HPC)、「アプリ」(CoE)の3つの柱で、スーパーコンピュータのシステム及びソフトウェア開発、並びに利用拡大が推進されている。

1-3 本ワーキンググループで議論する事項

「京」の共用開始から7年、ポスト「京」のためのアプリケーション開発・研究開発の開始から5年程度が経過し、計算科学及び関連研究分野、並びに社会のニーズが大きく変化する中、ポスト「京」の能力を最大限に活用し、社会に直接・間接的に還元できる成果を早期に創出するために、本ワーキンググループでは、以下の事項について、議論を行った。

- ポスト「京」のためのアプリケーション開発で重点的に取り組んだ課題の早期成果創出のためにはどのような支援の在り方が適切か。また、重点課題の成果創出フェーズの目標設定はどのようにすべきか。
- ポスト「京」が新たに取り組むべき社会的・科学的課題は何か。
- ポスト「京」の特長を生かした計算科学とデータ科学の融合、さらにはAIなどの研究を発展させるためにはどのような環境整備や支援をすべきか。
- ポスト「京」の国家プロジェクトでの利活用と一般公募型の利活用の割合はどの程度にすべきか。また、産業界での利活用の割合や成果の取扱いはどのようにすべきか。
- ポスト「京」ユーザーのすそ野拡大のために何をすべきか。
- ポスト「京」で生み出されたデータをどのように管理、共有し、利活用すべきか。
- 国内外への成果や波及効果の発信のためにどのような取組ができるか。
- 関係府省、大学、研究機関、産業界等との連携をどのように図るべきか。

などについて、ポスト「京」の運用開始に向けて、利活用に係る基本方針及び推進方策についての課題を洗い出し、整理したものである。

コメントの追加 [A12]: 加藤委員

コメントの追加 [A13]: 安浦委員

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、あらゆる分野における新たな科学的知見の発見といった科学的成果と、ナノテクノロジーやバイオテクノロジーに基づく設計・評価などの産業応用や気象・災害予測といった社会的成果であり、これらの多くはアプリケーションによって創出される。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、アプリケーション開発・研究開発及び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期待想定されている。

コメントの追加 [A14]: 加藤委員

コメントの追加 [A15]: 加藤委員

【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や再生医療等の先端医療の実現に貢献する。
- 超高齢社会の三大疾患「がん・脳機能障害・心疾患」。多様な病態をもつ超高齢社会の三大疾患「がん・脳機能障害・心疾患」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】

- 地震、津波などの複合災害やそれが引き起こす都市被害、さらにはその被害に対する社会の対応の一連の過程のシミュレーションを実現し、内閣府（防災担当）や防災コンサルタントによって活用されることで、災害に強い都市づくりに貢献する。
- 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 時間の猶予を確保することで、気象災害に対する防災力の

劇的向上に貢献する。

【エネルギー問題】

- 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することで、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）の実現に貢献し、全人類共通の課題であるエネルギー問題の解決に資する。
- 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について、超精密解析を短時間で繰り返し行うことを実現し、大幅な信頼性向上、コスト削減等~~を~~達成することで、クリーンエネルギーの社会普及に貢献する。

【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。
- 自動車、ターボ機械、航空機等のシミュレーションを高速化・高精度化し、企業へ展開して実機による安全性実験等を代替することで劇的なコスト~~削減~~、開発サイクルの短期化を実現し、我が国のものづくりに革新をもたらすことに貢献する。

【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ことに貢献する。

また、これらの重点課題と並行して、ポスト「京」で取り組むチャレンジングな課題（萌芽的課題）として、極限へ挑戦する基礎科学のフロンティア、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、太陽系外惑星の誕生と太陽系内惑星環

境変動の解明、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、の4つのテーマについて、アプリケーション開発に取り組んできた。

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が整備されており、「計算工学ナビ」では HPC アプリ利活用の促進のための解析事例データベースの整備やニュースレターの公開を行っている。また、「MateriApps」では国内外で開発された、あるいは今後開発される計算物質科学アプリケーションが約 250 件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。

コメントの追加 [A16]: 高田委員

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。）では、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発の推進は、調査研究・準備研究フェーズ（平成 26 年度～平成 27 年度）、本格実施フェーズ（平成 28 年度～平成 31 年度）、成果創出フェーズ（平成 32 年度（2020 年度）以降）の 3 つのフェーズから構成されることとされていた。2020 年度以降の成果創出フェーズの実施に当たっては、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、成果を創出することとされており、ポスト「京」で達成可能となる科学的・社会的課題の解決に向けて、あるいは我が国の社会経済への実装による社会的課題の解決という早期の成果創出を目指す必要がある。

コメントの追加 [A17]: 伊藤委員、加藤委員

また、萌芽的課題は、「重点課題報告書」では、「ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題」とされており、平成 28 年度～平成 29 年度の調査研究・準備研究フェーズ終了後、平成 30 年度～平成 31 年度において本格実施フェーズが実施されている。2020 年度以降、萌芽的課題で平成 31 年度までに開発したアプリケーションを利活用した研究開発は、重点課題の成果創出フェーズに組み込むかたちでの一部としてこれらを実施すべきであり、「ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題」更なるチャレンジングな課題については、必要に応じ、新たな戦略に基づ

コメントの追加 [A18]: 藤井委員

コメントの追加 [A19]: 藤井委員

く領域を設定することが適当である。

さらに、1.に記載したように、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であり、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。

以上を踏まえると、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必要がある。

- ① 重点課題及び萌芽的課題で推進されてきたアプリケーション開発・研究開発成果創出フェーズの実施に当たっては、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、ポスト「京」で達成可能となる科学的・社会的課題の解決に向け、早期の成果創出を目指す必要がある。このため、重点課題及び萌芽的課題並びにポスト「京」開発におけるCo-designの成果を最大限に活用して、ポスト「京」による成果創出を加速すべく、2020年度より新たに「ポスト「京」成果創出加速プログラム（仮称）」を実施する。

実施に当たっては、2019年度中に重点課題及び萌芽的課題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・採択を行い、2020年度当初より課題を実施できるようなスケジュールとする。

実施体制については、AI・データ科学との融合などの新しい課題への対応等、重点課題が開始された5年前からの状況変化を踏まえ、産業界や行政の利用者などアプリケーションの最終的な利用者も含めた、より効率的でかつ実効性の高い実施体制を検討すべきである。その検討に当たっては、ポスト「京」を最大限に用いた研究成果の創出に集中するとともに、課題の規模や研究領域の括りに関しても再度検討し、機動的に研究開発が実施できるような体制で進めるべきである。例えば、現在の重点課題及び萌芽的課題のような比較的大きな領域を括りとして研究開発体制の構築をするのではなく、ポスト「京」を最大限に用いた研究成果の創出に集中

コメントの追加 [A20]: 加藤委員、安浦委員

する中規模（数千万～1億円程度）の課題とし、これを重点課題の5領域程度の括りで機動的に研究開発をマネジメントする体制で進めるべきである。また、新たな体制の中では、一定の利用者循環を生み出す仕組みを導入することで、課題参加者利用者の固定化を避け、研究領域の内外で新たな課題参加を促進することも期待される。

コメントの追加 [A21]: 宇川委員、住委員

さらに、重要な成果である広報・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を開発したり、利用したりする人材の育成も、長期的な視点での成果の創出としてはきわめて重要であり、等はそのためには、上記の研究開発課題とは独立した(別の)課題群としてこれらを実施すべきである。

コメントの追加 [A22]: 加藤委員

コメントの追加 [A23]: 宇川委員

コメントの追加 [A24]: 加藤委員

また、これらの課題には、2020年度のポスト「京」のアーリーアクセスプログラム（共用開始前の早期利用特別措置）及び HPCI 第2階層資源の効率的な利用を提供すべきである。また、ポスト「京」や情報基盤センター等の（HPCI 第2階層計算資源を提供している）スーパーコンピュータに、本プロジェクトで開発したアプリケーションの整備を加速するために、これらの課題群では、2020年度から実施される予定のポスト「京」アーリーアクセスプログラム（共用開始前の早期利用に関する特別措置）によるポスト「京」の早期利用可能にするとともに、必要に応じて、HPCI 第2階層資源を配分すべきである。

コメントの追加 [A25]: 宇川委員、加藤委員

② 新たな課題への対応

近年第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、これらの分野におけるポスト「京」等の大規模スーパーコンピュータの利活用の推進による利用はもちろん、シミュレーションと AI・データ科学の融合・連携が重要となる。すなわち、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、シミュレーションを科学的・社会課題の解決に向けてさらに高度化しつつ、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）が重要となるため、これらの手法を含む研究開発を強力に推進する必要がある。

コメントの追加 [A26]: 加藤委員

計算科学とデータ科学の融合は、重点課題や萌芽的課題の中でも行われており、

そのさらなる発展が期待される。さらに、これまで重点課題や萌芽的課題として実施されていた領域に加えて、行政、経済、交通、教育等の人文・社会科学領域をはじめ様々な研究領域において、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期待されることから、重点課題の中に新たな領域を設定して推進すべきであるが、その開始は2020年度以降のできるだけ早い時期に、新規領域の設定と課題の実施を開始すべきであるとすることが考えられる。

コメントの追加 [A27]: 伊藤委員、藤井委員、安浦委員

コメントの追加 [A28]: 加藤委員、藤井委員

③ 事業推進に当たり留意すべき点

課題に求められる要件は、「重点課題報告書」において、以下の通りとされている。

コメントの追加 [A29]: 住委員

○社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】

○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】

○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】

成果創出フェーズにおいては、上記の観点を踏まえ、さらに、以下の事項にも留意しつつ、適切なプロジェクト推進体制（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）の下で、推進すべきである。

・成果創出フェーズにおいては、人類の英知の源泉となる、大きな科学的成果を創出したり、成果を社会に実装を目指したりする観点から、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を重視すること。とともに、実装が順調に進捗しているか確認する仕組みが必要である。

コメントの追加 [A30]: 加藤委員、伊藤委員

計算で得られた計算結果データは貴重な知的資源である。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とともに、研究機関等で収集される実験データも含めてその利活用に対する方策が整備される必要がある。

・科学と社会の関係性をさらに深化させることにより、「Society 5.0」、持続可能な開発目標（SDGs）等の実現に貢献すること。

コメントの追加 [A33]: 住委員

・アカデミアはもとより、産業界においても、次世代の人材育成や研究者のすそ野拡大は最重要課題である。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仕組みとする。

コメントの追加 [A34]: 高田委員

・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、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、組織的に取組を推進すること。（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。）

コメントの追加 [A35]: 高田委員

・ポスト「京」から創出される膨大な計算結果データは、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ことから、産業界も含めた幅広いユーザーが活用できるよう、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とともに、研究機関等で収集される実験データも含めてその利活用に対する方策を整備すること。

コメントの追加 [A36]: 高田委員

・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環境を整備すること。

コメントの追加 [A37]: 原田委員、安浦委員

・必要がある。また、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、これを可能とする体制を構築すること。必要がある。

~~以上を踏まえた、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）を実現すべきである。~~

3. ポスト「京」の利活用促進について

「京」は、スーパーコンピュータとして初めて「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、世界最高水準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」の下、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てきた。また、「京」を中核とした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（HPCI）も併せて構築され、利用者視点に立って、幅広いユーザーに計算科学技術の研究基盤を提供する取組が行われてきた。

施設利用研究については、スーパーコンピュータを利用する機関等からなる HPCI コンソーシアムとの連携・協力の下、若手人材育成課題、産業利用課題、トライアル・ユースといった公募制度が創設され、利用者、産業界等からの声を踏まえて、公募時期を年2回に拡大するなど柔軟に対応してきた。

ポスト「京」では、「京」で培ってきたこれらの制度の利点は踏襲しつつ、「Society5.0」を見据えた、更なる利便性の向上、利用分野の拡大、成果創出の最大化等を目指し、利活用に関する基本方針を改善する必要がある。

「重点課題報告書」の中では、計算資源配分の骨子として、重点課題枠（30-40%程度）、一般利用枠・分野振興枠（30-40%程度）、産業利用枠（10%程度）、政策対応枠（10%程度）、調整高度化枠（10%程度）とされ、これらの計算資源配分枠の詳細については、重点課題の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、とされていた。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、ともされていた。

こうしたこれまでの考え方を基本としつつ、ポスト「京」の計算資源配分は、以下のような配分枠とする。

① 一般利用枠(40%程度)

- ・公募により選定し、幅広い研究課題を対象とする。
- ・年度ごとに、「優先分野」を設定し、優先的に採択する（「データ科学・AI」は優先分野の一例）。
- ・一定の規模及び基準を満たす申請について、短期間で審査を行い、機動的に実施できる試行的利用の仕組みを設ける。

② 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を対象とする。
- ・公募により選定し、幅広い研究課題を対象とする。
- ・一定の規模及び基準を満たす申請について、短期間で審査を行い、機動的に実施できる試行的利用の仕組みを設ける。
- ・~~計算内容について一定の確認は行うが、採否の審査は行わず、~~成果公開表の義務を課さない有償利用の仕組みを設ける。

コメントの追加 [A38]: 宇川委員

③ 成果創出加速枠(40%程度)

- ・「ポスト「京」成果創出加速プログラム(仮称)」に採択された課題を対象とする。

④ 調整高度化・~~利用拡大枠(10%程度)~~

- ・ポスト「京」の運用主体である理化学研究所計算科学研究センターが中心となって、安定全運転のためのシステム調整、ユーザー利用支援のための研究開発、データ科学・AI分野を含めた幅広いユーザーの利用に資する高度化研究・利用支援、ユーザー拡大及び計算科学の先導的研究開発を実施する。

※運用初期における、ポスト「京」の安定運用を確保するための調整や、新しい利用法の検討及び計算科学の先導的研究開発については、ポスト「京」が使いやすいシステムとなることを保障する観点から、柔軟な計算資源配分を行う。

コメントの追加 [A39]: 安浦委員

⑤ 政策対応枠(~~枠外 10%程度~~)

- ・政策的に重要又はかつ緊急な課題の実施を対象とする。特に、国が実施する他の研究開発プロジェクトでの利用を積極的に推進する(計算資源のみの提供)。

なお、有償利用については、現在も①及び②の一部の課題で導入されているが、さらに促進するための仕組みについて、検討を進める。国費で整備したスーパーコンピュータを、成果公開を義務としない個社が利用することについては、国内外の先行事例、関係団体の意見等も踏まえつつ、慎重に制度設計を行うことが必要である。

コメントの追加 [A40]: 伊藤委員

また、近年、世界のHPC利用者の多くが利用し、国内の大規模スーパーコンピュータセンター等でも導入事例のある、計算資源のクラウド的な利用形態については、ユーザーの利用者拡大やユーザーの利便性向上に資すると考えられ、ポスト「京」にお

いてもこれを可能とする意義は認められる。まずは、ポスト「京」の運用主体である理化学研究所が、④の一部として試行的に実施し、ユーザーの声や利用実態を踏まえて、新たな制度設計の必要性を判断することが適当である。

ポスト「京」の設置者である理化学研究所は、AI・データ科学のユーザーコミュニティと連携・協力しつつ、AI・データ科学等の新たな分野のニーズに応じた利用方法（データサイエンティストのデファクトとなっているスクリプト言語環境やライブラリの整備、インタラクティブ処理等）を、可能な限り実現すべきである。また、HPCIコンソーシアムや共用法に基づく登録施設利用促進機関等との連携・協力の下、定期的にユーザーの求める機能やサポート等を把握し、適切な対応をとるための取組を行うなど、今後の計算科学の進展や社会情勢の変化を踏まえた、ポスト「京」に対するユーザーニーズの変化に、柔軟に対応し続けることが必要である。

「京」の産業利用は着実に進展し、平成 30~~2018~~年度には「京」の利用者の3割が産業界の利用者となり、累計180社以上が「京」を利用している。今後は、スーパーコンピュータを利用したシミュレーションやデータ科学の成果が、多種多様な産業により広く深く浸透し、規制基準、評価等に導入されるなど、実社会において具体的に活用されていくための取組が重要である。このため、ポスト「京」における成果早期創出の観点から、今まで「京」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」でも利用できるように維持・管理するとともに、産業界の利用する商用ソフトやオープンソースソフトウェアの環境整備を継続的に行っていく必要がある。また、第2階層計算資源を含めたHPCI全体としてのシームレスかつ効果的な役割分担と連携・協力を継続し、情報セキュリティの現状理解と評価（リスクとメリットが判断できる情報の提供）、大規模データハンドリングなどへの対応も行っていくべきである。さらに、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、一般の研究者のみならず、産業界の利用を可能とすることも重要である。

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

平成 24 年 ~~9-6~~ 月の共用開始以降、HPCI の中核となってきた「京」の運用が停止され、2021～22 年頃までにポスト「京」の運用が開始されることで、HPCI の構成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、計算科学及び社会経済の動向にも大きな変化が生じており、HPCI は変革期に入っていると考えられる。また一方で、スーパーコンピュータの開発と活用は、欧米やアジアにおいても、先を競って行われている。国際競争力の視点はより一層重要になってきている。

コメントの追加 [A41]: 白井委員

今後の HPCI の在り方については、人類の普遍的な知の探究への貢献と、我が国の国際競争力の強化を目指す、科学技術振興のグランドデザインに基づき、我が国の科学技術・学術研究成果の最大化を支える、国家的科学技術・学術情報インフラが、安定的な運用と切れ目のないサービスを継続する ことが極めて重要である。このために、スーパーコンピュータ（ポスト「京」を含む HPCI）、高速ネットワーク（SINET）、大容量記憶などのハードウェアインフラ、及び、大規模データベース、ソフトウェアライブラリ等、情報基盤全体が、どのように整備・運用されるべきかという議論が、本ワーキングとは別の場において、しっかりとなされることを期待する。

コメントの追加 [A42]: 安浦委員